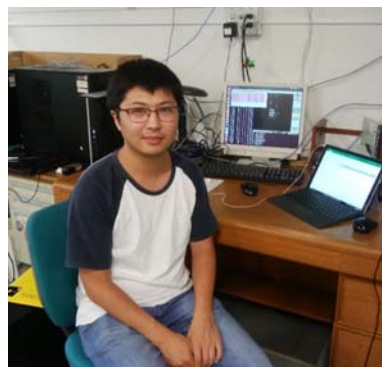


大学名	横浜国立大学		
University	Yokohama National University		
外国人研究者	テグシュジャルガル キシグジャルガル		
Foreign Researcher	TEGSHJARGAL KHISHIGJARGAL		
受入研究者	上田一義	職名	教授
Research Advisor	Ueda, Kazuyoshi	Position	Professor
受入学部/研究科	工学研究院		
Faculty/Department	Graduate school of engineering		

<外国人研究者プロフィール/Profile>

国籍	モンゴル
Nationality	mongol
所属機関	モンゴル国立大学
Affiliation	National University of Mongolia
現在の職名	上級講師
Position	Senior Lecturer
研究期間	2017年7月5日～2017年10月2日
Period of Stay	from 5th July 2017 to 2nd October 2017
専攻分野	計算機化学
Major Field	Computational Chemistry



横浜国大にて/TEGSHJARGAL KHISHIGJARGAL in Yokohama National University

<外国人研究者からの報告/Foreign Researcher Report>

①研究課題 / Theme of Research
Quantum chemical calculation using density functional method is one of the powerful methods to investigate the structure and the electronic properties of materials. We applied this method to improve the device efficiency of the organic solar cell. The research target is to calculate the work function change of the anode SnO ₂ surface which was modified with various benzoic acids derivatives. We also try to investigate the properties of the modified surface of ITO with organic molecules.
②研究概要 / Outline of Research
As a model to mimic the real anode surface, we chose tin oxide (SnO ₂) surface and simulated it using density functional theory with Hubbard parameter. The experimental bandgap value of tin oxide is 3.6 eV but pure density functional theories underestimate the band gap value of metal oxides. By implementing Hubbard parameter, we obtained reasonable band gap value (1.2 eV) on SnO ₂ (110) surface which enabled us further detailed analysis of electronic structure of this surface.
③研究成果 / Results of Research
We analyzed the electronic structure of surface of SnO ₂ and found that the surface oxygen atoms show different electronic structure than that of bulk oxygens. It also found that the valence band increased by adding the benzoic acid derivatives on its surface. Most of the valence band originated from phenyl carbon atoms of benzoic acid and bridging oxygen atoms of SnO ₂ surface. Before the modification of benzoic acids, the minimum of the conduction band corresponded to surface tin and oxygen atoms, but after the modification, the minimum of the conduction band originated from oxygen and carbon atoms of benzoic acid.
④今後の計画 / Further Research Plan
Density functional theories are very sophisticated methods to investigate the electronic structure of various materials. In this work, we could successfully obtain the basic electronic properties of SnO ₂ surface with organic molecules on it. Based on these experiences, we next try to investigate the more complicated systems, such as ITO with organic molecules on its surface. We also want to proceed the collaboration on the research and the exchange the students not only with the Yokohama National University but also Miyazaki University.

<受入研究者からの報告/Research Advisor Report>

①研究課題 / Theme of Research

研究課題は「Density functional simulation of the metal oxide surfaces modified with organic molecules」である。留学生は横浜国大の当研究室において学位を取得した。そのテーマは、密度汎関数法を用いて安息香酸誘導体で修飾したSnO₂表面の電子特性を研究したものである。しかし、当時は研究の第一段階で、修飾分子の結合位置および結合状態等の詳細な条件との関係が未解明であった。留学生が現在在籍するモンゴル国立大学ではNano Science laboratoryが設置されており、留学生は、そこでの実験研究者と共に、学位取得以降も受け入れ研究者と共同研究を続けている。しかし、遠距離の情報交換はどうしても滞りがちである。留学生の来日により議論も容易になり、短期に研究を進めることができると期待するものである。さらに、来日中に宮崎大学訪問も予定しており、日本での共同研究の開拓も期待する。モンゴルは鉱物資源が多く、実験による利用研究が進められているが、本国での将来の研究展開にも、計算化学面からの基盤の確立に寄与できるものと期待する。

②研究概要 / Outline of Research

現在、金属酸化物表面の構造・電子状態について共同研究を行っており、その結果についての解析とまとめを、本学で共同研究している実験研究者を交えて進めた。具体的には①表面修飾したSnO₂表面の電子特性の密度汎関数法による解析および集中的な議論による論文作成②表面修飾したITO表面計算のモデル作成と計算を議論し、軌道に乗せる③宮崎大学での講演と議論、留学生に将来の共同研究先を開拓させる。

③研究成果 / Results of Research

金属酸化物表面の構造・電子状態について、その結果についての解析とまとめを、本学で共同研究している実験研究者を交えて進めることが出来た。具体的には①表面修飾したSnO₂表面の電子特性の密度汎関数法による解析および集中的な議論による論文の原稿作製②表面修飾したITO表面計算のモデル作成と計算については、本学の同様のテーマで研究を進めている学生との技術交流を行い、共同研究の進展を軌道に乗せることが出来た。さらに、③宮崎大学での講演と議論を通して、留学生の将来の共同研究先として交流を深めたのみならず、留学生が所属するモンゴル国立大学の学生の留学先の候補としても受け入れの快諾を得た。また、モンゴルは天然資源が豊富である。その資源の活用を目的に、本学の実験研究者と天然ゼオライトの計算等のテーマについても留学生の受け入れを含め、議論を進めることが出来た。

④今後の計画 / Further Research Plan

金属酸化物表面の研究は有機太陽電池の重要なターゲットであり、構造と電子状態に関する情報は重要である。我々は学内の実験研究者と共に有機薄膜型の表面研究を進めているが、この分野の競争は世界的に激しい。留学生はモンゴル国立大学のNano science 研究室に所属し、我々との共同研究を進めているが、研究のスピードアップが必要である。今回の来日により、本学の同様のテーマを進めている学生との交流もでき、今後は益々頻りにインターネットを介してさらなる研究の交流が期待できる。また、モンゴルは天然資源が豊富である。その資源の活用を目的に、本学の実験研究者との共同研究やモンゴル国立大学からの留学生の受け入れについても援助していく予定である。



研究室での討論風景/ snapshot of the discussion in the lab.



宮崎大学・湯井研究室訪問・講演/Seminar at Miyazaki University, Yui lab.



宮崎大学・湯井研究室訪問・講演/Seminar at Miyazaki University, Yui lab.